

Перенормування енергії електронів з врахуванням парціальних фононних зсувів для каскадних, багат шарових нанолазерів

Гришук А.М.¹, Гришук В.В.¹, Гуцул В.І.²

¹ Житомирський державний університет ім. І. Франка, м. Житомир, вул. Бердичівська 40, teor-caf@meta.ua.

² Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, вул. Коцюбинського 2, ktf@chnu.edu.ua

Сучасні прилади все більше базуються на використанні нанотехнологій [1]. Для того, щоб пояснити спектр випромінювання каскадного нанолазера, створеного на основі багат шарової наногетеросистема, необхідно знати як впливають на цей спектр усі типи коливань, що виникають у такій системі. В даній роботі представлено електронний спектр, перенормований фононними коливаннями.

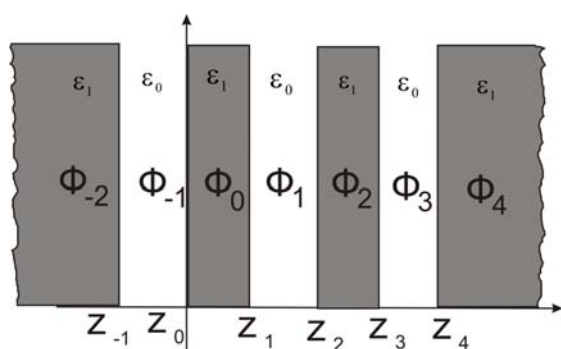


Рис. 1. Геометрична схема квантового дроту

Розглядається наногетеросистема, яка складається із п'яти шарів $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ розміщених у напівпровідникове середовище $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (рис. 1). Така система являє собою каскадний напівпровідниковий нанолазер [2].

У наближенні ефективної маси та прямокутного скінченного потенціального бар'єру

$$U(z) = \begin{cases} U_0 & (-\infty, z_{-1}) \cup (z_0, z_1) \cup (z_2, z_3) \cup (z_4, \infty) \\ 0 & (z_{-1}, z_0) \cup (z_1, z_2) \cup (z_3, z_4) \end{cases}, \quad (1)$$

$$\mu(z) = \begin{cases} \mu_0 & (-\infty, z_{-1}) \cup (z_0, z_1) \cup (z_2, z_3) \cup (z_4, \infty) \\ \mu_1 & (z_{-1}, z_0) \cup (z_1, z_2) \cup (z_3, z_4) \end{cases} \quad (2)$$

стаціонарне рівняння Шредінгера для електрона із гамільтоніаном

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\mu(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + U(z) \quad (3)$$

розраховується в декартовій системі координат. Повний набір хвильових функцій шукається у вигляді[3]

$$\psi_i(z) = A_i \exp(k_i z) + B_i \exp(-k_i z) \text{ де } i=-2, -1, \dots, 4. \quad (4)$$

тут $A_{-2}, B_4 = 0$, а $k_i = i \sqrt{\frac{2\mu(z)}{\hbar^2} (U(z) - E)}$

енергетичний спектр такої системи знаходиться із дисперсійного рівняння

$$\frac{k_2 \mu_1}{k_1 \mu_2} = i \frac{-A_1 \exp(k_i z) + B_1 \exp(-k_i z)}{A_1 \exp(k_i z) + B_1 \exp(-k_i z)} \quad (5)$$

де коефіцієнти A_1 та B_1 знаходяться з граничних умов та умови нормування хвильової функції.

Перевід гамільтоніана (3) до зображення вторинного квантування на системі хвильових функцій (4) можна представити наступним чином:

$$\hat{H}_e = \sum_n E_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n \quad (6)$$

де енергії E визначені із рівняння (4) а \hat{a}_n^+ та \hat{a}_n — оператори Фермі породження та знищення електронних станів.

Гамільтоніан фононів знаходиться на основі моделі діелектричного континууму [4,5,6] у вигляді

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{q,j} \Omega_{qj} \left(\hat{b}_{qj}^+ \hat{b}_{qj} + \frac{1}{2} \right) \quad (7)$$

де індекси q, j нумерують фононні вітки та середовища наносистеми.

Гамільтоніан електрон-фононої взаємодії у зображенні вторинного квантування за всіма змінними системи виражається через потенціал поля поляризації на повній ортонормованій системі хвильових функцій (4) і має вигляд

$$\hat{H}_{int} = \hat{H}_{e-L} + \hat{H}_{e-I} \quad (8)$$

$$\text{де} \quad \hat{H}_{e-L} = \sum_{\substack{n,n' \\ q,s_m}} F_{Ln}^{n'}(q, s_m) \hat{a}_n^+ \hat{a}_{n'} (\hat{b}_{q,s_m}^+ + \hat{b}_{-q,s_m}) \quad (9)$$

— гамільтоніан взаємодії електрона з обмеженими фононами, а

$$\hat{H}_{e-I} = \sum_{\substack{n,n' \\ q,s}} F_{In}^{n'}(q, s) \hat{a}_n^+ \hat{a}_{n'} (\hat{b}_{s,q}^+ + \hat{b}_{s,-q}) \quad (10)$$

— гамільтоніан взаємодії електрона з інтерфейсними фононами. Аналітичні вирази для функції зв'язку взаємодії з обмеженими та інтерфейсними фононами можна представити у вигляді:

$$F_{Ln}^{n'}(q, s_m) = -\sqrt{2\pi e^2 \Omega_L} \left(\frac{1}{\varepsilon_{m\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_{0m}} \right)^{1/2} \frac{A_m}{q_m} \int_{z_m}^{z_{m+1}} \Psi_m^*(z) Z_m(z) \Psi_m(z) dz \quad (11)$$

та

$$F_{In}^{n'}(q, s) = -\sqrt{\frac{\Omega_{qs} e^2}{(z_{m+1} - z_m) Y_{qs} \omega_{qs}}} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \Psi_n^*(z) \Psi_n \sum_{j=2}^4 \Phi^j(z) \right\} dz \quad (12)$$

Тоді, повний Гамільтоніан системи набуде вигляду

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{e-L} + \hat{H}_{e-I}, \quad (13)$$

що дозволяє застосувати метод функції Гріна для знаходження перенормованого фононами електронного спектра. Як відомо для багатозонної системи електронів, що взаємодіють з фононами й описуються гамільтоніаном (13), при $T = 0$ К Фур'є-образ електронної функції Гріна визначаються із рівняння Дайсона

$$G_{\mu\mu}(k, \omega) = \left\{ \omega - E_{\mu}(k) - M_{\mu\mu}(k, \omega) \right\}^{-1} \quad (\mu = \{n, q\}) \quad (14)$$

У випадку слабкої електрон-фононої взаємодії яка реалізується у дослідженій наносистемі основний внесок в перенормування енергії електрона дає однофононна діаграма. Тому масовий оператор, можна записати у вигляді:

$$M(k, \omega) = M_L(k, \omega) + M_I(k, \omega) \quad (15)$$

тут

$$M_L(k, \omega) = \sum_{q,n',s_m} \frac{|F_{Ln}^{n'}(q, s_m)|^2}{\omega - E_{n'}(k-q) - \Omega_{L,s_m}} \quad (16)$$

— масовий оператор який описує внески у перенормовану енергію основної зони від взаємодії обмежених фононів з електронами.

$$M_I(k, \omega) = \sum_{q,n',s} \frac{|F_{In}^{n'}(q, s)|^2}{\omega - E_{n'}(k-q) - \Omega_{I,s}} \quad (17)$$

— масовий оператор який описує внески у перенормовану енергію основної зони від взаємодії інтерфейсних фононів з електронами.

Перенормована фононами енергія (\tilde{E}_{10}) основного електронного рівня ($k=0$) визначається з дисперсійного рівняння

$$\omega - \tilde{E}_{10} - M(\omega) = 0 \quad (18)$$

Величину \tilde{E}_{10} визначають через повний зсув (Δ) основного рівня

$$\tilde{E}_{10} = E_{10} + \Delta \quad (19)$$

Враховуючи вигляд масового оператора (15), повний зсув енергії доцільно подати у вигляді суми парціальних зсувів

$$\Delta = \Delta_L + \Delta_I \quad (20)$$

де $\Delta_L = \text{Re}(M_L(k, \omega))$, $\Delta_I = \text{Re}(M_I(k, \omega))$

які зумовлені відповідними механізмами електрон-фононої взаємодії.

Розрахунки проведені для багатошарової наногетеросистеми $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$. В якій присутні тільки віртуальні фонони. Тому їх взаємодія з електронами відбувається лише у процесах випромінювання. Основний стан при цьому зміщується лише у напрямку менших енергій, залишаючись стаціонарним. Внутрішньозонна взаємодія електрона з фононами майже повністю формує зсув основного рівня тільки при такій ширині наноплівки, при якій у ямі ще немає збудженого стану. При дуже малих товщина шару основний внесок в повний зсув дає взаємодія електрона з інтерфейсними фононами. При великій товщині наноплівок значення Δ наближається до відповідної величини зсуву у масивному кристалі.

[1]. Cao J C 2003 Phys. Rev. Lett. 91, 237401.

[2]. Faist J et al 1994 Science 264, 533

[3] M.V. Tkach, V. Holovatsky, O. Votsekhivska, M. Mykhalyova, R. Fartushunsky, Phys Stat.Sol. 225, 331, 2001.

[4] Гуцул В.І., Грищук А.М Актуальні проблеми фізики напівпровідників, 28 вересня-1 жовтня, Дрогобич 2010 С.53

[5] Wai-Sang Li, Chuan-Yu Chen, Physica B, 1997, 375.

[6] Грищук А.М., Грищук В.В, Лашкарьовські читання, м. Київ, 5-7 Жовтня 2010р. с. 35-36.